

游荡在思考的迷宫中

甄景贤 (King-Yin Yan) and Juan Carlos Kuri Pinto

General.Intelligence@Gmail.com

Abstract. 简单介绍笔者的强人工智能理论和强化学习、动态规划、最优控制、Hamiltonian 力学系统的关系。

1 经典逻辑 AI 背景

Strong AI 的问题在理论上已经被数理逻辑完整地描述了，余下的问题是学习算法，因为在逻辑 AI 的架构下，学习算法很慢（复杂性很高），这就是我们要解决的。

我研究 logic-based AI 很多年，因此我的思路喜欢将新问题还原到逻辑 AI 那边去理解，但实际上我提倡的解决办法不是靠经典逻辑，甚至不是 symbolic 的。但在这篇文章我还是会经常跳回到逻辑 AI 去方便理解。

用数理逻辑模拟人的思想是可行的，例如有 deduction, abduction, induction 等这些模式，详细可见《Computational logic and human thinking》by Robert Kowalski, 2011. 这些方面不影响本文的阅读。值得一提的是，作者 Kowalski 是 logic programming，特别是 Prolog，的理论奠基人之一。

在经典逻辑 AI 中，「思考」是透过一些类似以下的步骤：

前提 \vdash 结论 (1)

$\boxed{\text{今天早上下雨}} \vdash \boxed{\text{草地是湿的}}$ (2)

亦即由一些命题 (propositions) 推导到另一些命题。

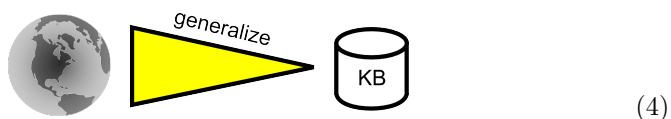
推导必须依靠一些逻辑的法则命题 (rule propositions)，所谓「法则」是指命题里面带有 x 这样的变量 (variables)：

$\boxed{\text{地方 } x \text{ 下雨}} \wedge \boxed{x \text{ 是露天的}} \vdash \boxed{\text{地方 } x \text{ 是湿的}}$ (3)

这些法则好比「逻辑引擎」的燃料，没有燃料引擎是不能推动的。

注意：命题里面的 x ，好比是有「洞」的命题，它可以透过 substitution 代入一些实物 (objects)，而变成完整的命题。这种「句子内部」(sub-propositional) 的结构可以用 predicate logic（谓词逻辑）表达，但暂时不需要理会这些细节。

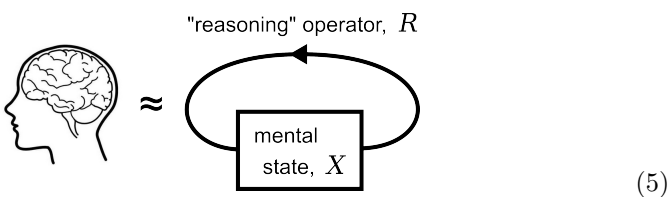
Logic-based AI 可以看成是将世界的「模型」压缩成一个「知识库」(knowledge-base, KB), 里面装著大量逻辑式子:



世界模型是由大量的逻辑式子经过组合而**生成**的, 有点像向量空间是由其「基底」生成; 但这生成过程在逻辑中特别复杂, 所以符号逻辑具有很高的**压缩比**, 但要学习一套逻辑知识库, 则相应地也有极高的**复杂度**。

2 中心思想

关键是将「思考」看成是一个**动态系统** (dynamical system), 它运行在**思维状态** (mental states) 的空间中:



举例来说, 一个**思维状态**可以是以下的一束命题:

- 我在我的房间内, 正在写一篇 AGI-16 的论文。
- 我正在写一句句子的开头: 「举例来说,」
- 我将会写一个 NP (noun phrase): 「一个思维状态....」

思考的过程就是从一个思维状态 **过渡** (transition) 到另一个思维状态。就算我现在说话, 我的脑子也是靠思维状态记住我说话说到句子结构的哪部分, 所以我才能组织句子的语法。

思维状态是一支向量 $x \in X$, X 是全体思维空间, 思考算子 (reasoning operator) R 是一个 automorphism 映射: $X \rightarrow X$ 。

换句话说: 我们将逻辑 AI 的整套器材搬到向量空间中去处理。这个做法, 部分是受到 Google 的 PageRank 和 Word2Vec [2] 算法的启发, 因为它们都是在向量空间中运作, 而且非常成功。

3 控制论

以下内容可以在一般「现代控制论」教科书中找到，例如：

- Daniel Liberzon 2012: *Calculus of variations and optimal control theory – a concise introduction*
- 李国勇 2008: 《最优控制理论与应用》
- 张洪钺、王青 2005: 《最优控制理论与应用》

一个[动态系统 \(dynamical system\)](#) 可以用以下方法定义：

$$\text{离散时间:} \quad \mathbf{x}_{t+1} = \mathbf{F}(\mathbf{x}_t) \quad (6)$$

$$\text{连续时间:} \quad \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) \quad (7)$$

其中 f 也可以随时间改变。如果 f 不依赖时间，则系统是 time-invariant（定常的），形式上如 (7) 那种微分方程叫作 autonomous（自主的）。

在我的智能系统理论里，我把 F 或 f 设定成 RNN (recurrent neural network)，即反馈式神经网络：

$$\text{离散时间:} \quad \mathbf{x}_{t+1} = \boxed{\text{RNN}}(\mathbf{x}_t) \quad (8)$$

$$\text{连续时间:} \quad \dot{\mathbf{x}} = \boxed{\text{RNN}}(\mathbf{x}) \quad (9)$$

这里 recurrent 指的是它不断重复作用在 \mathbf{x} 之上，但实际上它是一个普通的前馈式 (feed-forward) 神经网络。注意：在抽象理论中， f 和 F 可以是任意函数，我把它们设计成 NN 只是众多可能的想法之一。之所以选用 NN，是因为它有 universal function approximator 的功能，而且是我们所知的最「聪明」的学习机器之一。

在我提出的智能系统里， $\dot{\mathbf{x}}$ 是由[學習機器](#)給出的，換句話說， $\dot{\mathbf{x}}$ 是思維狀態在梯度下降至最佳狀態時的[方向導數](#)。

一个（连续时间的）[控制系统 \(control system\)](#) 定义为：

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t) \quad (10)$$

其中 $\mathbf{u}(t)$ 是[控制向量](#)。控制论的目的就是找出最好的 $\mathbf{u}(t)$ 函数，令系统由初始状态 \mathbf{x}_0 去到终点状态 \mathbf{x}_\perp 。

注意：人工智能中的 [A* search](#)，是动态规划的一个特例。换句话说，用动态规划在某个空间中「漫游」，可以模拟到 best-first 搜寻的功能。

在这框架下，智能系统的运作可以分开成两方面：[思考](#) 和 [学习](#)。

思考即是根据已学得的知识（知识储存在 RNN 里），在思维空间中寻找 \mathbf{x} 最优的轨迹，方法是用控制论计算 \mathbf{u}^* 。 \mathbf{x} 的轨迹受 RNN 约束（系统只能依据「正确」的知识去思考），但思考时 RNN 是不变的。

学习就是学习神经网络 RNN 的 weights W 。此时令 $u = 0$ ，即忽略控制论方面。

以上两者是两个独立的方面，但不排除它们可以在实际中同时进行。

3.1 控制论与强化学习的关系

在**强化学习**中，我们关注两个数量：

- $R(\mathbf{x}, a)$ = 在状态 \mathbf{x} 做动作 a 所获得的**奖励**(reward)
- $U(\mathbf{x})$ = 状态 \mathbf{x} 的**效用**(utility) 或 **价值** (value)

简单来说，「价值」就是每个瞬时「奖励」对时间的积分：

$$\boxed{\text{价值 } U} = \int \boxed{\text{奖励 } R} dt \quad (11)$$

（价值有时用 V 表示，但为避免和势能 V 混淆故不用。）

用**控制论**的术语，通常定义 cost functional：

$$J = \int L dt + \Phi(\mathbf{x}_{\perp}) \quad (12)$$

其中 L 是“running cost”，即行走每一步的「价钱」； Φ 是 terminal cost，即到达终点 \mathbf{x}_{\perp} 时，那位置的价值。

在**分析力学**里 L 又叫 Lagrangian，而 L 对时间的积分叫「作用量」：

$$\boxed{\text{作用量 (Action)}} S = \int L dt \quad (13)$$

Hamilton 的**最小作用量原理** (principle of least action) 说，在自然界的运动轨迹里， S 的值总是取稳定值 (stationary value)，即比起邻近的轨迹它的 S 值最小。

所以有这些对应：

强化学习	最优控制	分析力学
效用/价值 U	价钱 J	作用量 S
即时奖励 R	running cost	Lagrangian L
action a	control u	(外力?)

用比较浅显的例子：和美女做爱能带来即时的快感 (= 奖励 R)，但如果强奸的话会坐牢，之后很长时间很苦闷，所以这个做法的长远价值 U 比其他做法较低，正常人不会选择它。

有趣的是，奖励 R 对应於力学上的 Lagrangian，其物理学单位是「能量」；换句话说，「快感」或「开心」似乎可以用「能量」的单位来量度，这和通俗心理学里常说的「正能量」不谋而合。而，长远的价值，是以 [能量 \times 时间] 的单位来量度。

一个智能系统，它有「智慧」的条件，就是每时每刻都不断追求「开心能量」或奖励 R 的最大值，但它必需权衡轻重，有计划地找到长远的效用 U 的最大值。

3.2 经典分析力学 (analytical mechanics)

分析力学的物理内容，完全是牛顿力学的 $F = ma$ ，但在表述上引入了能量和 Hamiltonian 等概念，再使用微积分和变分法。

Lagrange 方程

Lagrange 引入了 Lagrangian $L = T - V$ ，可以分拆成动能 T 和势能 V 两部分。

重点是：动能 T 是速度 \dot{x} 的函数，势能 V 是位置 x 的函数。

问题：如果在强化学习中的「快感 / 奖励」对应於 Lagrangian L ，如何在奖励之中分拆出「动能」和「势能」的分量？

$$\boxed{\text{Lagrange equation}} \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0 \quad (14)$$

这些方程的座标是 (x, \dot{x}) ，可以了解成位置空间 (configuration space) 上的 tangent bundle (下述)。

Hamilton 方程

Hamiltonian $H = T + V$ ，亦即总能量，但它表示成位置 x 和动量 p 的函数。

$$\boxed{\text{Hamilton equation}} \quad \begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \end{cases} \quad (15)$$

这些方程的座标是**相位空间 (phase space)** (\mathbf{x}, \mathbf{p}) 。

位置空间和相位空间之间的变换是 **Legendre transformation**:

$$\boxed{\text{tangent bundle}} \quad TX \rightarrow T^*X \quad \boxed{\text{cotangent bundle}} \quad (16)$$

$$(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \mapsto (\mathbf{x}, \mathbf{p}) \quad (17)$$

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \quad \Rightarrow \quad H := \mathbf{p}\dot{\mathbf{x}} - L \quad (18)$$

Hamilton-Jacobi 方程

$$\boxed{\text{Hamilton-Jacobi equation}} \quad H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (19)$$

其中 S 是「作用量」。下面我们会用动态规划的原理推导出此一方程。

Poisson 括号

$$\boxed{\text{Poisson 括号}} \quad \{F, H\} := \sum_i \left\{ \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right\} \quad (20)$$

在力学系统中，它表示任意一力学量（函数 f ）对时间的改变量：

$$\dot{f} = \{f, H\} \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial}{\partial q} \dot{q} \quad (22)$$

以上使用了微分的 chain rule，但由於 $\dot{\mathbf{p}}$ 和 $\dot{\mathbf{q}}$ 可以由 Hamilton 方程 (15) 给出，所以得到 Poisson 括号的形式 (20)。

每个物理学生都知道的「经典—量子对应原理」：

$$[\mathbf{F}, \mathbf{G}] \quad \Leftrightarrow \quad i\hbar\{F, G\} \quad (23)$$

这对应原理是 P.A.M. Dirac 发现的。

在经典力学里，

$$\{\mathbf{x}, \mathbf{p}\} = 1 \quad (24)$$

但在量子力学里，

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \quad (25)$$

这也是 Heisenberg 测不准原理的由来：

$$\Delta \mathbf{X} \Delta \mathbf{P} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (26)$$

如果在某一流形上，「广义」Poisson 括号是 nondegenerate（非退化）的，则它变成了辛流形结构的 $\omega = \{\cdot, \cdot\}$ 括号（下述）。

3.3 Hamiltonian 的出现

考虑一个典型的控制论问题，系统是：

$$\text{状态方程:} \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t] \quad (27)$$

$$\text{边值条件:} \quad \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}(t_{\perp}) = \mathbf{x}_{\perp} \quad (28)$$

$$\text{目标函数:} \quad J = \int_{t_0}^{t_{\perp}} L[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), t] dt \quad (29)$$

要找的是最优控制 $\mathbf{u}^*(t)$ 。

Lagrange multiplier 是找极大/小值的常用方法：如果我们要找：

$$\max f(x) \quad \text{subject to} \quad g(x) = 0 \quad (30)$$

Lagrange 建议我们建构 Lagrangian 函数：

$$L(x, \lambda) = f(x) - \lambda g(x) \quad (31)$$

然后求解：

$$\nabla_{x, \lambda} L = 0 \quad (32)$$

现在将 Lagrange multiplier 方法应用到我们的问题上，会发现新的目标函数是：

$$J = \int_{t_0}^{t_{\perp}} \{L + \boldsymbol{\lambda}^T(t) [f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) - \dot{\mathbf{x}}]\} dt \quad (33)$$

因此可以引入一个新的标量函数 H ，即 Hamiltonian：

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) = L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) + \boldsymbol{\lambda}^T(t) f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (34)$$

物理学上， \mathbf{f} 的单位是速度，而 L 的单位是能量，所以 λ 应该具有 动量 的单位。

极小值原理

Lev Pontryagin (1908-1988) 提出了 极小值原理，是经典变分法的推广。经典变分法的最优条件是：

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} = \mathbf{0} \quad (35)$$

极小值原理将最优条件改成是：

$$\min_{u \in \Omega} H(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \mathbf{u}, t) = H(\mathbf{x}^*, \boldsymbol{\lambda}^*, \mathbf{u}^*, t) \quad (36)$$

即是说：在最优轨迹 $\mathbf{x}^*(t)$ 和最优控制 $\mathbf{u}^*(t)$ 上， H 取最小值。它的好处是，当 $\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}}$ 不连续或不存在时，或者 \mathbf{u} 受其他约束时，也可以应用。

粗略来说，极小值原理比经典变分法更一般，而动态学习又比极小值原理更一般。

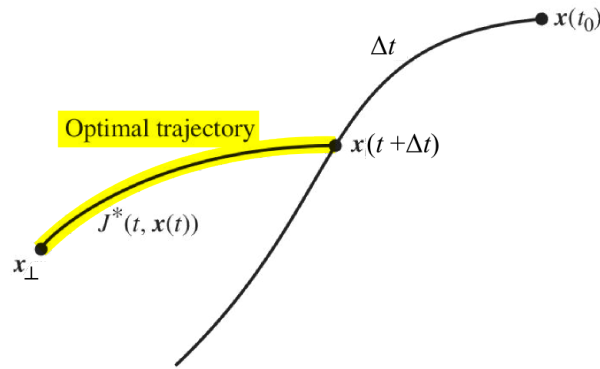
Hamilton-Jacobi-Bellman 方程

- Stanislaw Zak (2003): *Systems and control*

用动态规划的 **Bellman optimality condition** 可以推导出微分形式的 Hamilton-Jacobi-Bellman 方程。重温一下，Bellman 最优条件说的是：「从最优路径末端切去一小截之后，余下的还是最优路径。」它通常写成如下的 recursive 形式：

$$\boxed{\text{最优路径}} = \boxed{\text{在小段上选取最大奖励}} + \boxed{\text{余下的最优路径}} \quad (37)$$

$$J_t^* = \max_u \{ \boxed{\text{奖励}(u, t)} + J_{t-1}^* \} \quad (38)$$



(39)

我们在时间 interval 的开端切出一小段：

$$[t_0, t_{\perp}] = [t_0, t_0 + \Delta t] \cup [t_0 + \Delta t, t_{\perp}] \quad (40)$$

我们想优化的目标函数是：

$$J^*(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}) = \min_u \left\{ \int_{t_0}^{t+\Delta t} L d\tau + \int_{t+\Delta t}^{t_\perp} L d\tau + \Phi(t_\perp, \mathbf{x}_\perp) \right\} \quad (41)$$

根据 Bellman 条件，目标函数变成：

$$J^*(t, \mathbf{x}) = \min_u \left\{ \int_{t_0}^{t+\Delta t} L d\tau + J^*(t + \Delta t, \mathbf{x}(t + \Delta t)) \right\} \quad (42)$$

用 Taylor series 展开右面的 J^* ：

$$J^* + \frac{\partial J^*}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial J^*}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t)) + \text{H.O.T.} \quad (43)$$

左右两边的 J^* 互相消去，而且 $\mathbf{x}(t + \Delta t) - \mathbf{x}(t) \approx \dot{\mathbf{x}} \Delta t$ ，於是有：

$$0 = \min_u \left\{ \int_{t_0}^{t+\Delta t} L d\tau + \frac{\partial J^*}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial J^*}{\partial \mathbf{x}} \dot{\mathbf{x}} \Delta t + \text{H.O.T.} \right\} \quad (44)$$

又由於 Δt 很小，而且 $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}$ ，所以：

$$0 = \min_u \left\{ L \Delta t + \frac{\partial J^*}{\partial t} \Delta t + \frac{\partial J^*}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f} \Delta t + \text{H.O.T.} \right\} \quad (45)$$

全式除以 Δt 并令 $\Delta t \rightarrow 0$ ：

$$0 = \frac{\partial J^*}{\partial t} + \min_u \left\{ L + \frac{\partial J^*}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f} \right\} \quad (46)$$

记得 Hamiltonian 的定义是 $H = L + \frac{\partial J^*}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}$ ，所以得到想要的结果：

$$\boxed{\text{Hamilton-Jacobi equation}} \quad 0 = \frac{\partial J^*}{\partial t} + \min_u H \quad (47)$$

这个方程和量子力学中的 [Schrödinger equation](#) 很相似：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[V(x, t) + \frac{-\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \right] \Psi(x, t). \quad (48)$$

其中 Ψ 类似於我们的 J （或许 Ψ 是自然界希望取极值的某种东西？）

3.4 Symplectic 结构

- Stephanie Singer (2001): *Symmetry in mechanics – a gentle, modern introduction*
- 鍾万勰 2011: 《力、功、能量与辛数学》

Symplectic 的拉丁文意思是「互相交错 (intertwined)」, 它用来描述 Hamiltonian 系统的几何结构。中文译作「辛」是音译。Symplectic 概念是 Hermann Weyl 研究 Hamilton 系统的对称性时在 1939 年提出的。

在数值计算上, 处理 Hamilton 系统时, 如果算法尊重 symplectic 结构 (叫 symplectic integrators), 会比一般的算法更准确; 而一般解微分方程的算法, 例如 Euler 算法和 Runge-Kutta 算法, 有时会给出错误的结果。

举例来说, 从 Hamiltonian 的角度来看, 动量 p (momentum) 和速度 v (velocity) 是成对偶的, p 总是伴随 v 出现, 因为 $p \cdot v = mv^2$ 的单位是能量。

举另一个例子, 假设我们有两个用来定义系统状态的向量:

$$x_1 = \begin{pmatrix} s_1 \\ f_1 \end{pmatrix}, \quad x_2 = \begin{pmatrix} s_2 \\ f_2 \end{pmatrix} \quad (49)$$

其中 s 是位移 (单位是长度), f 是力。这两个向量的「辛内积」定义为:

$$\begin{aligned} \langle x_1, x_2 \rangle &= x_1^T J x_2 \\ &= \begin{pmatrix} s_1 \\ f_1 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_2 \\ f_2 \end{pmatrix} \\ &= f_2 s_1 - f_1 s_2 \end{aligned} \quad (50)$$

其中矩阵 J 就是辛的微分形式 ω 的结构矩阵 (下述)。由於 $f \cdot s$ 表示的是「所做的功」, 上式表示的是

(状态 1 的力对状态 2 的位移所做的功)–

(状态 2 的力对状态 1 的位移所做的功) (51)

也就是「相互功」, 辛正交则 $\langle x_1, x_2 \rangle = 0$, 代表 work reciprocity (功的互等), 所以辛几何是一种关于能量的代数。

在微分几何里, 研究抽象的 Hamiltonian systems, 会发现 symplectic 结构。这结构用微分流形 M 及其上的一个微分形式 (differential form) ω 来定义。需要一些微分几何的基础.....

Vectors and co-vectors

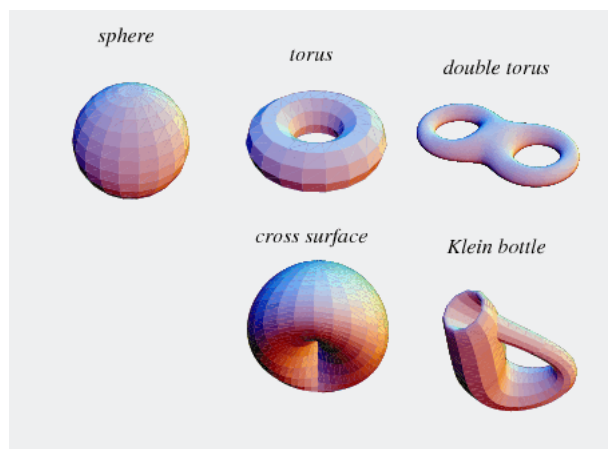
Vector 和 co-vector 之间的关系, 可以看成是「 d 别人的东西」和「被别人 d 的东西」, 这里 d 表示微分。

「 d 别人的东西」是线性的 differential operators, 记作 $\frac{\partial}{\partial x_1}$ 、 $\frac{\partial}{\partial x_2}$ 等; 它们很自然地组成一个 vector space $T_x M$ 。

「被别人 d 的东西」是一些线性的微分形式，记作 dx_1 、 dx_2 等；它们属于 $T_x M$ 的 dual space。

Manifolds

基本上「流形」的意思是「弯曲的空间」，它们局部地近似于 Euclidean 空间 \mathbb{R}^n ，局部的坐标可以分段用一组微分映射来描述，这些 maps 叫 charts。



(52)

Phase space

「相位空间」指的是力学系统里， i 个粒子的位置 x_i 和动量 p_i 合并而成的 (\mathbf{x}, \mathbf{p}) 空间。但 configuration space 指的是所有可容许的位置 \mathbf{x} 的空间。

Vector fields, differential forms, Hamiltonian flow

根据 Hamilton 方程，再用微分的 chain rule 可以得到：

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \quad (53)$$

它是一个微分算子，亦即是向量场；它有个特别的名字叫 Hamiltonian flow \vec{H} (很多书记作 X_H)：

$$\vec{H} := \frac{d}{dt} = \{\cdot, H\} \quad (54)$$

可以看出 $\vec{H}H = \{H, H\} = \frac{dH}{dt} = 0$ 就是能量守恒的形式。

Hamilton 系统的动态方程就是：

$$\dot{\mathbf{x}} = \vec{H} \quad (55)$$

所以在我们的智能系统中，RNN 可以看成是 \vec{H} 。

$$\omega = \sum_i dx_i \wedge dp_i \quad (56)$$

$$\omega(\vec{H}, \cdot) = dH \quad (57)$$

我暂时不很明白它的意义。

我们说 Hamiltonian flow 保持 (preserve) 辛结构。假设 $\Gamma_t(\mathbf{x}_0) = \mathbf{x}(t)$ 描述 Hamiltonian flow 的轨迹； $\Gamma_0(\mathbf{x}) \equiv \mathbf{x}$ 。The **pullback** of ω along Γ is still ω :

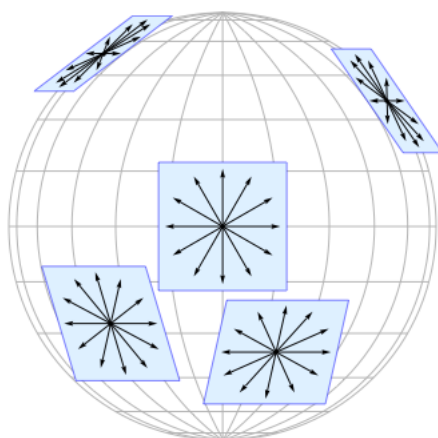
$$\Gamma_t^* \omega = \omega \quad (58)$$

$$\vec{H}H = 0 \quad \text{is equivalent to} \quad \Gamma_t^* \omega = \omega \quad (59)$$

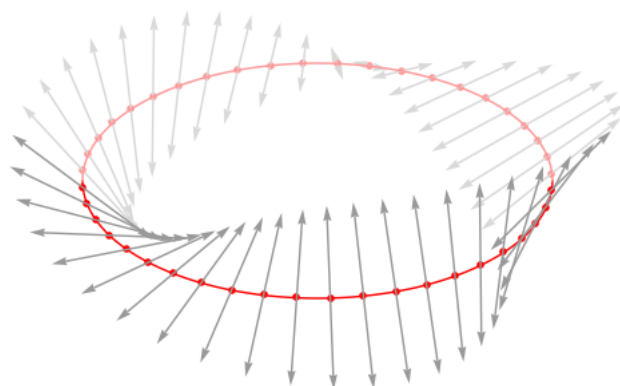
Tangent and co-tangent bundle

在流形上每点有一个 tangent space，所谓 tangent bundle 是指流形上每点 x 的 tangent space $T_x M$ 的总和：

$$TM := \bigcup_{x \in M} T_x M \quad (60)$$



Tangent bundle on a 2-sphere (61)



Bundle with Möbius strip topology

(62)

粗略地, tangent bundle 可以看成是 $M \times T_x M$, 而 M 和 $T_x M$ 的维数都是 n , 所以 tangent bundle 的维数是 $2n$ 。在力学上, **cotangent bundle** 就是相位空间 (\mathbf{x}, \mathbf{p}) 的空间 (The phase space of a mechanical system is the cotangent bundle of its configuration space)。

Push forward, pull back

Energy conservation, area form

(Stephanie §4.4)

Symmetry of Hamiltonian system, Lie groups

Symplectic groups 是一些保存辛结构的变换 T 的群:

$$\omega(Tx, Ty) = \omega(x, y) \quad \forall x, y \in V \quad (63)$$

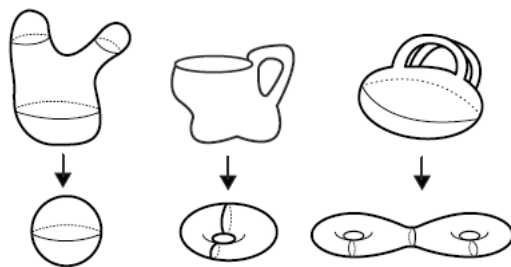
V 是向量空间。在 V 上的 symplectic 变换的全体记作 $Sp(V)$ 。

Momentum maps

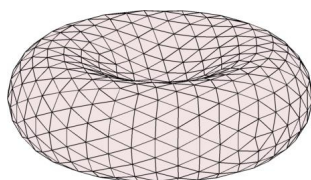
3.5 动态系统理论

Floer homology

Homology (同调论) 研究的是空间中「有没有穿洞」的模拓结构。最简单的 **singular homology** 是将空间用三角形剖分 (triangulation), 然后透过著名的 Euler formula $V + F = E + 2$ 及其扩充, 让我们可以计算 Euler characteristic χ , 此即空间穿洞的个数。

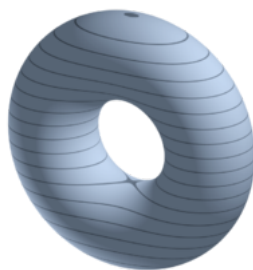


(64)



(65)

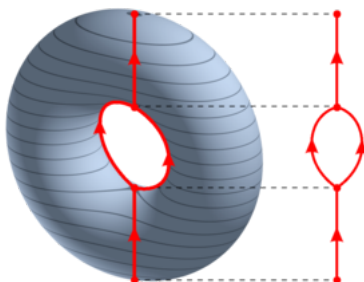
当这些三角形剖分趋於无穷小时, 我们得到用微分形式 (differential forms) 描述的 homology, 即 **de Rham homology**。



(66)

在流形上定义一个 potential function, 例如简单的 height function, 就可以做 Morse theory, 这时每个点可以根据势能函数向下流 (gradient flow), 流到一些最低位置, 它们是临界点 (critical points)。Morse decomposition 将空间用这些临界点分割 (流到同一临界点的 flows 认作同一 equivalent class), 得到的是

Morse homology。



(67)

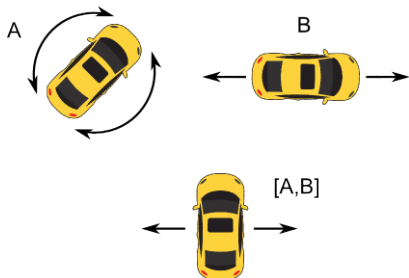
Floer homology 是 Morse homology 的无限维空间版本，比较难计算。

Conley theory

Entropy, ergodicity

Lie algebra 的另一应用

例如一架车可以有两个基本动作：(A) 绕中心旋转、或 (B) 前后行驶，它们的 Lie 括号 $[A, B]$ ，产生出的动作是左右方向行驶，这类似於「平行泊车」的时候，车子的移动方向：



(68)

(可控性与 “reachable” 概念。)

Stable, unstable, and center manifold

Smale horseshoe

4 最优控制的计算方法

直接法

间接法

Lyapunov 函数第一方法

Lyapunov 函数第二方法

5 Jacobian 神经网络学习算法

经典的神经网络 back prop 学习算法，它是一个 error-driven 算法，但在很多人工智能的实际应用中，不存在唯一的「理想答案」，而是根据正或负的奖励 (reward) 学习。当答案正确时，奖励 > 0 , error = 0; 当答案不正确时，奖励 < 0 , 但 error 仍是不知道的 (因为不知道理想答案)。简言之，就是不能用 error-driven 学习。

所以我想出了一个 reward-driven 的学习法：假设神经网络将 $\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{y}_0$ ，它通常也会将 \mathbf{x}_0 的邻域 map 到 \mathbf{y}_0 的邻域。如果我们想「加强」这个映射，可以将「更大的 \mathbf{x}_0 的邻域」映射到「接近 \mathbf{y}_0 的邻域」。

这种算法对人工智能应该很重要，暂时我还想不出有什么其他办法，可以做到 [深度] 神经网络的 reward-driven 学习。

将这思想更准确化，可以将 feed-forward 神经网络的构造看成是这样的：

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (69)$$

$$\mathbf{y} = \bigcirc^{\overset{\ell}{L}} \tilde{W} \dots \bigcirc^{\ell} \tilde{W} \dots \bigcirc^1 \tilde{W} \mathbf{x} \quad (70)$$

其中 W 代表每一层 (layer) ℓ 的矩阵。

F 的反方向是：

$$\mathbf{x} = \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y}) \quad (71)$$

$$\mathbf{x} = \overset{1}{\rhd} \bigcirc \dots \overset{\ell}{\rhd} \bigcirc \dots \overset{L}{\rhd} \bigcirc \mathbf{y} \quad (72)$$

注意： $\rhd = W^{-1}$ ， $\bigcirc = \bigcirc^{-1}$ ，形状不同。

假设在 \mathbf{x} 空间有体积元 U ，经过 \mathbf{F} 变换成 \mathbf{y} 空间的体积元 V ，那么：

$$U = |J| \cdot V \quad (73)$$

$J = \left[\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right]$ 叫 Jacobian 矩阵。

在我们的情况下， $|J| = \left| \frac{\partial \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \right|$ 在 \mathbf{y}_0 的值，代表「单位体积元由 $\mathbf{y}_0 \mapsto \mathbf{x}_0$ 的变化率」。(下面会看到， \mathbf{F} 和 \mathbf{F}^{-1} 的正/反方向不太重要，因为基本上不影响计算复杂度。)

每次得到**正奖励**，我们会令 Jacobian $|J|$ 增加一点：

$$|J| := \det \left[\frac{\partial \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \right]_{n \times n} \quad (74)$$

下标表示那是一个 $n \times n$ 矩阵。

其实 Jacobian 矩阵的意义就是：

$$J = \left[\frac{\partial \text{输出}}{\partial \text{输入}} \right] \quad (75)$$

神经网络的输入和输出都是 $\dim n$ ，所以 Jacobian 很自然是 $n \times n$ 矩阵。

用**梯度下降法**，我们需要计算这些梯度： $\left[\frac{\partial |J|}{\partial \mathbf{W}} \right]$ ，总数是网络中的 weights 的个数 $= \sum m_\ell$ 。

要用到 determinant 的微分公式：

$$\frac{d}{dt} |A(t)| = \text{tr}(\text{adj}(A) \cdot \frac{dA(t)}{dt}) \quad (76)$$

$$\text{adj}(A) := |A| \cdot A^{-1} \quad (77)$$

换句话说，对於每个权重 $w := W_{ij}^\ell$ ，我们要计算：

$$\frac{\partial}{\partial w} |J| = \text{tr}(|J| \cdot J^{-1} \cdot \left[\frac{\partial J}{\partial w} \right]) \quad (78)$$

注意： $|J|$ 和 J^{-1} 是 \mathbf{y}_0 的函数，只需在大 loop 外一次过计算。

问题是，计算 $\left[\frac{\partial J}{\partial w} \right]_{n \times n}$ 的时候：

$$\frac{\partial J}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial \mathbf{F}^{-1}}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \stackrel{1}{\geq} \bigcirc \dots \stackrel{\ell}{\geq} \bigcirc \dots \stackrel{L}{\geq} \bigcirc \mathbf{y} \quad (79)$$

这牵涉到用 w 对 \mathbf{W}^{-1} 的分量微分，可以想像就算计了出来也会是极复杂的。解决办法是，索性「**本末倒置**」，用 \geq 来定义神经网络，然后在 forward propagation 时才用 $\mathbf{W} = \geq^{-1}$ 计算。

J 的分量写出来是：

$$J_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}_i^{-1}}{\partial y_j} = \frac{\partial}{\partial y_j} \left[\stackrel{1}{\geq} \bigcirc \dots \stackrel{\ell}{\geq} \bigcirc \dots \stackrel{L}{\geq} \bigcirc \mathbf{y} \right]_i =: \nabla_{ij}^1 \quad (80)$$

$$\begin{cases} \nabla_{ij}^1 &:= \sum_{k_1} \left[\stackrel{1}{\geq}_{ik_1} \bigcirc' (y_j^2) \nabla_{ij}^2 \right] \\ \nabla_{ij}^\ell &:= \sum_{k_\ell} \left[\stackrel{\ell}{\geq}_{k_{\ell-1}k_\ell} \bigcirc' (y_j^{\ell+1}) \nabla_{ij}^{\ell+1} \right] \\ \nabla_{ij}^L &:= \stackrel{L}{\geq}_{k_{L-1}j} \bigcirc' (y_j) \end{cases} \quad (81)$$

这情况完全类似於经典 back prop，以上只是 chain rule 的应用， ∇^ℓ 将每层用 chain rule 分拆开来，所以 ∇ 又叫 “local gradient”。上式就是整个网络的反向传递，其中每个 weight 出现 exactly 一次。

但工作还未完，我们要计算 $\frac{\partial J_{ij}}{\partial \mathfrak{z}} = \dot{\nabla}_{ij}^1$ 。（定义 $\mathfrak{z} := \mathfrak{z}_{gh}^\ell$ ， $k_0 := i$ ， $k_L := j$ ）

注意： $\mathbf{x} = \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y})$ ，所以 \mathbf{y} 是自变量， \mathfrak{z} 不影响 \mathbf{y} ，所以 $\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathfrak{z}} \equiv 0$ 。

\mathfrak{z} 必会是 \mathfrak{z} 的其中一元，但如果 $\mathfrak{z} \notin \mathfrak{z}$ ，以下的项微分后都会变成 0：

$$\begin{cases} \dot{\nabla}_{ij}^1 = \sum_{k_1} \left[\mathfrak{z}_{ik_1}^1 \odot'(y_j^2) \dot{\nabla}_{ij}^2 \right] \\ \dot{\nabla}_{ij}^\ell = \sum_{k_\ell} \left[\mathfrak{z}_{k_{\ell-1}k_\ell}^\ell \odot'(y_j^{\ell+1}) \dot{\nabla}_{ij}^{\ell+1} \right] \\ \dot{\nabla}_{ij}^L = \mathfrak{z}_{k_{L-1}j}^L \odot'(y_j) \equiv 0 \end{cases} \quad (82)$$

所以实际上只剩下一项：

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_{ij}}{\partial \mathfrak{z}} = \sum_{k_1} \left[\mathfrak{z}_{k_0k_1}^1 \odot'(y_j^2) \dots \sum_{k_\ell} \left[\mathfrak{z}_{k_{\ell-1}k_\ell}^\ell \odot'(y_j^{\ell+1}) \dots \right. \right. \\ \left. \left. \begin{cases} \dots \odot'(y_j^{\ell+1}) \dot{\nabla}_{ij}^{\ell+1} \end{cases} \right] \right] \\ \left. \begin{cases} \dots \odot'(y_j^{\ell+1}) \end{cases} \right] \quad \text{if } \mathfrak{z} \in \text{last layer} \end{aligned} \quad (83)$$

上式的意思是：每层 layer 重复一块 $[\sum \mathfrak{z} \odot]$ ，直到遇到 $\mathfrak{z} = \mathfrak{z}_{gh}^\ell$ ，则用结尾形式取代之。

和经典 back prop 不同的是，上式只是 $n \times n$ 矩阵中的一个元素，从复杂度而论，每个 weight 的 ∇ 计算，增加了起码 n^2 倍的复杂度（虽然其计算上可以共用一些结果）。记住 $n = \dim$ 状态空间。

可以这样理解：每个 weight 的调教，需要计算这个 weight 对 Jacobian 的影响，而那 Jacobian 是整个网络的特性。关键似乎就在於每个 weight 对 Jacobian 的影响。

现在回看更高层次的这个式子：

$$\frac{\partial}{\partial w} |J| = \text{tr}(|J| \cdot J^{-1} \cdot \left[\frac{\partial J}{\partial w} \right]) \quad (84)$$

$$= |J| \cdot \text{tr} \left(\left[\frac{\partial y}{\partial x} \right] \cdot \left[\frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial x}{\partial y} \right] \right) \quad (85)$$

$$= |J| \cdot \sum_{ij} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)_{ij} \left(\frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial x}{\partial y} \right)_{ij} \quad (86)$$

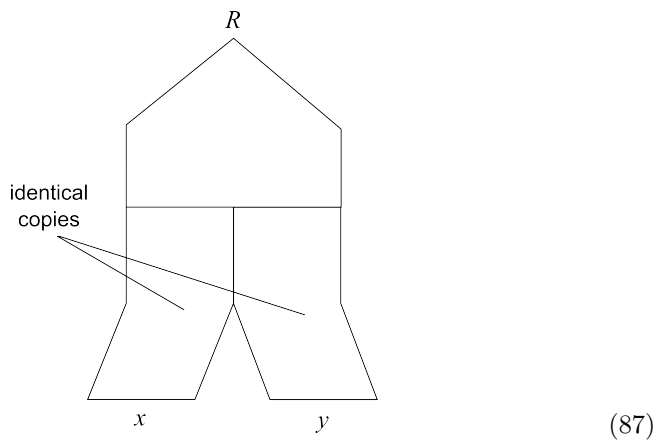
上式中最重要（最慢）的是那 $(i, j) \in n \times n$ 求和。裡面的第一个因子是 Jacobian J ，第二个因子是我们刚计算了的 $\nabla_w J^{-1}$ 。

Back prop 的 ∇ 形式上是 $\frac{\partial \text{输出}}{\partial \mathbf{w}}$ ，我们的 ∇ 形式是 $\left[\frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial \text{输入}}{\partial \text{输出}} \right]_{n \times n}$ 。

其实我们只需要计算 $\nabla_w |J|$ 的大约方向。暂时我在代码中的做法是：忽略式 (86) 中较小的项，那就不需做足 n^2 个乘积。

或者可不可以将 $|J|(\mathbf{w})$ 看成是一个 weight \mathbf{w} 的函数，然后用它的 Taylor series expansion 来近似？

Notes



或者，照旧是 feedforward network，但 somehow 它的学习是基於某 reward function。问题是这 reward function 从何而来？ R 可以是一个全部 W 的函数，是由我们任意定义的。

6 Jacobian learning algorithm

The classical back prop algorithm is **error-driven**, but in many AI problems the “correct” answers are not given, instead the feedback is provided via **rewards**. When an answer is correct, the reward $R > 0$, error $\mathcal{E} = 0$; when the answer is incorrect, $R < 0$, but \mathcal{E} is still unknown (because we don’t know the correct answer). In other words, error-driven learning is inapplicable.

So I thought of a reward-driven learning method: assume the neural network maps $\mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{y}_0$, usually it also maps the neighborhood of \mathbf{x}_0 to the neighborhood of \mathbf{y}_0 . If we wish to “strengthen” this pair of mapping, we can make a **bigger** neighborhood of \mathbf{x}_0 map to the same neighborhood close to \mathbf{y}_0 . We will make this precise.

This type of learning algorithm should be very useful to AI, and currently the author is not aware of other alternatives for training [deep] neural networks via rewards.

A feed-forward neural network can be constructed this way:

$$\mathbf{y} = \mathbf{F}(\mathbf{x}) \quad (88)$$

$$\mathbf{y} = \bigcirc^{\ell} \overset{\circlearrowleft}{W} \dots \bigcirc^{\ell} \overset{\circlearrowleft}{W} \dots \bigcirc^1 \overset{\circlearrowleft}{W} \mathbf{x} \quad (89)$$

where W represents the matrix of **weights** on each layer ℓ .

The **inverse** of F is:

$$\mathbf{x} = \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y}) \quad (90)$$

$$\mathbf{x} = \overset{\circlearrowright}{\geq}^1 \bigcirc^{\circlearrowright} \dots \overset{\circlearrowright}{\geq}^{\ell} \bigcirc^{\circlearrowright} \dots \overset{\circlearrowright}{\geq}^L \bigcirc^{\circlearrowright} \mathbf{y} \quad (91)$$

Note: $\overset{\circlearrowright}{\geq} = W^{-1}$, $\bigcirc^{\circlearrowright} = \bigcirc^{\circlearrowleft}^{-1}$, the shape is different.

Assume that in the space of \mathbf{x} there is a volume element U , which transforms via \mathbf{F} to a volume element V in the space of \mathbf{y} , then:

$$U = |J| \cdot V \quad (92)$$

$J = \left[\frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right]$ is called the **Jacobian** matrix.

In our case, the value of $|J| = \left| \frac{\partial \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \right|$ at \mathbf{y}_0 represents “the change in volume from $\mathbf{y}_0 \mapsto \mathbf{x}_0$ ”. (Below, we will see that the direction of \mathbf{F} or \mathbf{F}^{-1} is not too important, as either way the computational complexity is essentially the same.)

Every time we get a **positive reward**, we can let the Jacobian $|J|$ increase slightly:

$$|J| := \det \left[\frac{\partial \mathbf{F}^{-1}(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \right]_{n \times n} \quad (93)$$

The subscript indicates that it is a $n \times n$ matrix.

The meaning of the Jacobian matrix is:

$$J = \left[\frac{\partial \text{input}}{\partial \text{output}} \right] \quad (94)$$

The neural network's input and output are both of $\dim n$, so the Jacobian is naturally an $n \times n$ matrix.

To use **gradient descent**, we need to calculate these gradients: $\left[\frac{\partial |J|}{\partial \mathbf{W}} \right]$, their total number is the number of weights in the network $= \sum \ell \#(\dot{W})$.

We need the formula for the derivative of the determinant:

$$\frac{d}{dt} |A(t)| = \text{tr}(\text{adj}(A) \cdot \frac{dA(t)}{dt}) \quad (95)$$

$$\text{adj}(A) := |A| \cdot A^{-1} \quad (96)$$

In other words, for each weight $w := \dot{W}_{ij}$, we need to calculate:

$$\frac{\partial}{\partial w} |J| = \text{tr}(|J| \cdot J^{-1} \cdot \left[\frac{\partial J}{\partial w} \right]) \quad (97)$$

Note: $|J|$ and J^{-1} are functions of \mathbf{y}_0 , we only need to calculate them once outside the big loop.

Now a problem arises in the calculation of $\left[\frac{\partial J}{\partial w} \right]_{n \times n}$:

$$\frac{\partial J}{\partial w} = \frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial \mathbf{F}^{-1}}{\partial \mathbf{y}} = \frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \stackrel{1}{\rhd} \bigcirc \dots \stackrel{\ell}{\rhd} \bigcirc \dots \stackrel{L}{\rhd} \bigcirc \mathbf{y} \quad (98)$$

This requires us to differentiate W^{-1} w.r.t. w ; we can imagine the result would be very complicated. So we use a trick, by “reversing” the network, we use \rhd to define the network weights, and then use $W = \rhd^{-1}$ during forward propagation.

The components of J are:

$$J_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}_i^{-1}}{\partial y_j} = \frac{\partial}{\partial y_j} \left[\stackrel{1}{\rhd} \bigcirc \dots \stackrel{\ell}{\rhd} \bigcirc \dots \stackrel{L}{\rhd} \bigcirc \mathbf{y} \right]_i =: \nabla_{ij}^1 \quad (99)$$

$$\begin{cases} \nabla_{ij}^1 &:= \sum_{k_1}^1 [\overset{1}{\succcurlyeq}_{ik_1} \ominus'(y_j^2) \nabla_{ij}^2] \\ \nabla_{ij}^\ell &:= \sum_{k_\ell}^\ell [\overset{\ell}{\succcurlyeq}_{k_{\ell-1}k_\ell} \ominus'(y_j^{\ell+1}) \nabla_{ij}^{\ell+1}] \\ \nabla_{ij}^L &:= \overset{L}{\succcurlyeq}_{k_{L-1}j} \ominus'(y_j) \end{cases} \quad (100)$$

This situation is exactly analogous to the classical back prop algorithm; The above is just the application of the **chain rule**, with ∇^ℓ written separately for each layer, therefore ∇ is called the “local gradient”. The above formula amounts to propagating the entire network one time, where every weight appears **exactly once**.

But our work is not finished yet; We need to calculate $\frac{\partial J_{ij}}{\partial \overset{\ell}{\succcurlyeq}} =: \dot{\nabla}_{ij}^1$.

(Let's define $\overset{\ell}{\succcurlyeq} := \overset{\ell}{\succcurlyeq}_{gh}$, $k_0 := i$, $k_L := j$)

$\overset{\ell}{\succcurlyeq}$ would be an element of $\overset{\ell}{\succcurlyeq}$, but if $\overset{\ell}{\succcurlyeq} \notin \overset{\ell}{\succcurlyeq}$, all the terms below would vanish:

$$\begin{cases} \dot{\nabla}_{ij}^1 = \sum_{k_1}^1 \left[\overset{1}{\succcurlyeq}_{ik_1} \ominus'(y_j^2) \dot{\nabla}_{ij}^2 \right] \\ \dot{\nabla}_{ij}^\ell = \sum_{k_\ell}^\ell \left[\overset{\ell}{\succcurlyeq}_{k_{\ell-1}k_\ell} \ominus'(y_j^{\ell+1}) \dot{\nabla}_{ij}^{\ell+1} \right] \\ \dot{\nabla}_{ij}^L = \overset{L}{\succcurlyeq}_{k_{L-1}j} \ominus'(y_j) \equiv 0 \end{cases} \quad (101)$$

So what is left over is just this term:

$$\begin{aligned} \frac{\partial J_{ij}}{\partial \overset{\ell}{\succcurlyeq}} &= \sum_{k_1}^1 \left[\overset{1}{\succcurlyeq}_{k_0k_1} \ominus'(y_j^2) \dots \sum_{k_\ell}^\ell \left[\overset{\ell}{\succcurlyeq}_{k_{\ell-1}k_\ell} \ominus'(y_j^{\ell+1}) \dots \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \begin{cases} \dots \ominus'(y_j^{\ell+1}) \nabla_{ij}^{\ell+1} \\ \dots \ominus'(y_j^{\ell+1}) \end{cases} \right] \right] \quad \text{if } \overset{\ell}{\succcurlyeq} \in \text{last layer} \end{aligned} \quad (102)$$

The above formula means: For each layer we repeat a block of $[\sum \overset{\ell}{\succcurlyeq} \ominus]$, until we encounter $\overset{\ell}{\succcurlyeq} = \overset{\ell}{\succcurlyeq}_{gh}$, then we replace with the terminal form.

In contrast to classical Back Prop, the above formula gives us only one element in an $n \times n$ matrix; From the complexity point of view, calculating the ∇ for each weight is at least n^2 times as costly as classical Back Prop (even though we may re-use some intermediate computation results). Recall that $n = \dim$ state space.

We can understand it thusly: For each weight we try to calculate its influence towards the Jacobian, but the Jacobian is a **global** property of the network. The key seems to lie in how each weight **influences** the Jacobian.

Now let's look back at this higher-level formula:

$$\frac{\partial}{\partial w}|J| = \text{tr}(|J| \cdot J^{-1} \cdot \left[\frac{\partial J}{\partial w} \right]) \quad (103)$$

$$= |J| \cdot \text{tr} \left(\left[\frac{\partial y}{\partial x} \right] \cdot \left[\frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial x}{\partial y} \right] \right) \quad (104)$$

$$= |J| \cdot \sum_{ij} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)_{ij} \left(\frac{\partial}{\partial w} \frac{\partial x}{\partial y} \right)_{ij} \quad (105)$$

The most critical (slowest) part is the $(i, j) \in n \times n$ summation. The first factor inside \sum is the Jacobian J , the second factor is the $\nabla_w J^{-1}$ that we just calculated.

Back Prop's ∇ has the form $\frac{\partial \boxed{\text{output}}}{\partial \boxed{\text{weights}}}$

whereas our ∇ has the form $\left[\frac{\partial}{\partial \boxed{\text{weights}}} \frac{\partial \boxed{\text{input}}}{\partial \boxed{\text{output}}} \right]_{n \times n}$.

In fact we just need to calculate the **approximate** direction and size of $\nabla_w |J|$. Currently in our code we use this trick: ignore the smaller terms in (105), so we don't need to do all of n^2 products.

Or perhaps we can regard $|J|(\mathfrak{x})$ as a function of the weight \mathfrak{x} , and then use its Taylor series expansion to approximate?

References

1. Lo. Dynamical system identification by recurrent multilayer perceptrons. *Proceedings of the 1993 World Congress on Neural Networks*, 1993.
2. Mikolov, Sutskever, Chen, Corrado, and Dean. Efficient estimation of word representations in vector space. *Proceedings of workshop at ICLR*, 2013.
3. Siegelmann and Sontag. Turing computability with neural nets. *Applied Mathematics Letters*, vol 4, p77-80, 1991.